



TITLE:

# 材料界面・表面の原子-電子論的研究

AUTHOR(S):

楠田, 啓

---

CITATION:

楠田, 啓. 材料界面・表面の原子-電子論的研究. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2020, 2019: 49-49

ISSUE DATE:

2020-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/251129>

RIGHT:

材料界面・表面の原子～電子論的研究

Interface and surface in materials: atomic and electronic theory

京都大学大学院エネルギー科学研究科 楠田 啓

研究成果概要

金は、高い耐食性により優れた生体適合性を示すため、重要な生体金属材料の一つである。アミノ酸やペプチドの中には金表面に選択的に吸着するものも多く存在し、側鎖に電荷を有する荷電アミノ酸は特に金表面との親和性が高い。本研究では、そのような荷電性アミノ酸を含むペプチドの中でも特に重要性の高い RGD (アルギニン-グリシン-アスパラギン酸)トリペプチドに着目し、密度汎関数法による第一原理計算を用いて金表面への吸着挙動の解明を試みた。RGD 配列は細胞接着の足場となる細胞外マトリクスに含まれるアミノ酸配列であり、細胞は RGD 配列を認識することで基板へと接着することが知られている。従って RGD 配列と金属表面の相互作用を調べることは、細胞と金属表面の親和性を調べるうえで重要である。

RGD 配列と金表面の相互作用を解析するモデルとして、4 層の金(111)面上に 15Å の真空層を設け、真空層中に RGD を配置したモデルを作成した。RGD は金表面上の 4 つの吸着サイト(atop, fcc, hcp, bridge)に D 側鎖が接近する配位で初期配置された。比較のため、D 単体と同様に金表面上に配置したモデルも作成した。各モデルに対して構造最適化(使用ソフトウェア: Materials Studio)を行い、その後吸着エネルギー、電子密度分布、電子状態密度、静電ポテンシャルをそれぞれ計算した。計算条件は、基底関数に DNP を、交換相関汎関数として GGA-PW91 を用いた。電子のフェルミ分布は 0.005 Ha で smearing し、k 点サンプリングには 2×2×1 の Monkhorst-Pack k-point mesh を用いた。

RGD の最終的な吸着配位は、D 側鎖の二つのカルボキシル酸素が atop サイト上に配置される場合に再安定化し、吸着エネルギーも最小となった。吸着エネルギーの値は D 単体で計算した場合よりも低く、RGD トリペプチドを形成したことで金表面との親和性が向上したことが示された。電子状態密度の解析の結果、atop サイト上にて金原子とカルボキシル酸素の間に同エネルギー準位での共有結合性ピークが観測された。電子密度分布の解析においても同様に、擬共有結合的な電子密度の重なりが確認された。また、静電ポテンシャル分布の解析を行ったところ、RGD の D 側鎖が負に強く分極し、逆に R 側鎖が正に強く分極していることがわかった。このように、アミノ酸配列間を媒介する電荷分布・分極状態の変化が生じたことにより RGD の金表面は、D 単体よりも高い親和性を有するものと考えられる。

発表論文: S. Deguchi, M. Hakamada, M. Mabuchi, “Adsorption of RGD tripeptide on Au (111) surface”, Materials Transactions. **60** (2019) 1711-1715.